弾性チューブの吸着変形のスケーリング解析

東京都立大学 理学研究科　田村 啓造, 好村 滋行, 加藤 直

1　始めに

カーボンナノチューブはグラファイトのシートを丸めた構造をしており、他の材料にはない電気的、力学的な特性を示す。ナノチューブはナノワイヤーや電子装置などへの応用が期待されている。実際に基板吸着したナノチューブの電気伝導率などが研究されている。しかしナノチューブの抵抗率はその弾性変形に影響を受けることが知られている。基板吸着したナノチューブの変形はAFMなどの実験的手法によって研究されている [1]。このようにチューブの基板吸着による変形を研究することは非常に重要なことである。

2　バネ・ビーズモデル

1本の単層ナノチューブの基板吸着に着目する。このときの変形はチューブの断面のみを考えれば良い。断面に垂直な軸方向には同様の変形を受けていると考える。本研究では、この断面をバネ・ビーズモデルで表した。このモデルには次の3つのエネルギーの寄与を考えた。(i) ボンドの伸長エネルギー E_{s}、(ii) ボンド間の曲率エネルギー E_{b}、(iii) 基板-ビーズ間の相互作用エネルギー W。(iii) は一様な基板とビーズの間のファン・デル・ワールス相互作用による距離の -3 乗に比例する引力項と、排除体積相互作用による距離の -12 乗に比例する斥力項からなっている。

これら3つのエネルギーの総和 $E_{tot} = E_{\mathrm{s}} + E_{\mathrm{b}} + W$ を共役勾配法を用いて最小化することで、チューブの形状を求めた。

3　計算結果と考察

図1(a) はチューブ形状の計算結果の一例である。ここで c_{b} は曲げ定数である。またボンド長はほぼ自然長となっている。$c_{\mathrm{b}} = 1000$ の場合は基盤に吸着しているにも関わらず、チューブは変形を受けていない。c_{b} が小さくなるにつれ次第に大きな変形を受けていく。$c_{\mathrm{b}} = 100$、10 ではチューブと基板が接触した部分だけが平らになっている。$c_{\mathrm{b}} = 0.01$ のときには非常に大きな変形を受けて、曲率は部分的にしか存在していない。

図1(b) は曲率エネルギーを曲げ定数の関数としてプロットしたものである。ここで N はチューブのサイズである。c_{b} が大きい領域、すなわち変形を受けない領域では E_{b} が c_{b} に比例している。

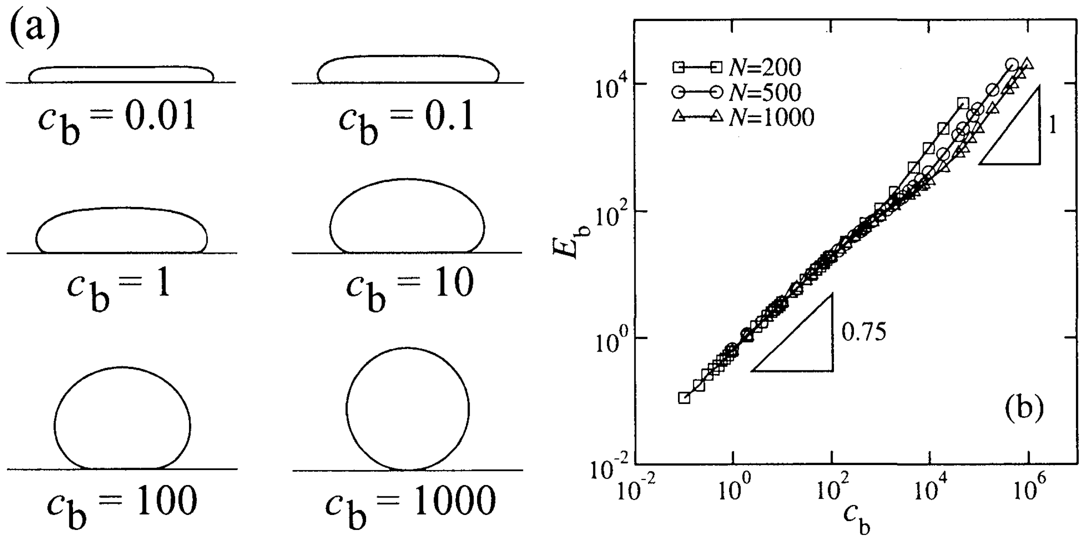

図 1: (a) チューブ形状の計算例。サイズ $N = 100$ の場合。(b) 曲率エネルギーと曲げ定数の関係。サイズ $N = 200, 500, 1000$ の場合を重ねてプロットしている。

この関係は次のように理解できる。このモデルではチューブの半径がサイズ N に比例しているので、曲率エネルギーは $E_b \sim N(c_b/N^2) \sim c_b/N$ となる。なお、このときのチューブの形状は図 1(a) の $c_b = 1000$ のようになる。

一方 c_b が小さい領域、すなわち大変形を受ける領域ではすべての N でグラフは重なっており、$E_b \sim c_b^{0.75}$ という関係があることがわかる。このことは弾性殻の理論 [2] をチューブの場合に適用して説明することができる。なお、このときのチューブの形状は図 1(a) の $c_b = 0.01$、0.1 のようになる。

変形を受けない領域と大変形を受ける領域の間にはクロスオーバーの領域がある。このときのチューブの形状は図 1(a) の $c_b = 1$、10、100 に対応する。

全エネルギー E_{tot} を c_b/N^2 という変数でプロットすると、全てのサイズでグラフが重なる。またどんなサイズでも、変形を受けない領域から変形を受ける領域へ転移するとき、c_b/N^2 はある一定値を持つことがわかった。

参考文献

[1] T. Hertel, R. E. Walkup and P. Avouris, Phys. Rev. B **58**, 13 870 (1998).

[2] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Theory of Elasticity* (Pergamon Press, Oxford) 1986.